

平成 30 年 5 月 17 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(S)

研究期間：2013～2017

課題番号：25220901

研究課題名(和文) 現物モデリングによる実験・計測融合マルチレベルトライボロジーシミュレータの開発

研究課題名(英文) Development of Experiment - and Measurement - Integrated Multilevel Tribology Simulator Based on Accurate Modeling

研究代表者

宮本 明 (MIYAMOTO, Akira)

東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授

研究者番号：50093076

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 162,400,000円

研究成果の概要(和文)：量子論のような原子・分子レベル理論を基礎に自動車用エンジンのような実用部品・機器を解析する方法論を確立するために、本研究では、(1)実験トライボロジーで現れる実構造・本物構造のコンピュータモデリング手法、(2)実構造・本物構造モデルからのトライボロジー物性の理論予測手法、(3)原子レベルからの積上げによるトライボ計測・トライボ試験結果予測手法、(4)原子レベルからの積上げによるトライボ部品・トライボ機器摩擦・摩耗挙動予測手法、(5)実験研究者との共同を加速するためのヒューマンインターフェイスを開発した。さらに、実験研究者との共同により開発シミュレータの有効性を多くの課題について実証した。

研究成果の概要(英文)：In order to establish novel methodology to analyze macroscopic tribological parts in mechanical system, we have developed in the present research project, (1) computational modeling software of realistic structure of the parts, (2) theoretical prediction of local physico-chemical-mechanical properties, (3) theoretical prediction of tribo-measurement and tribo-testing, (4) theoretical prediction of friction or wear properties of practical parts, (5) human interface for the multiscale, multiphysics tribological simulators to promote collaboration with experimental researchers. The availability of the developed system was demonstrated by many collaborations with experimentalists.

研究分野：分子材料設計学

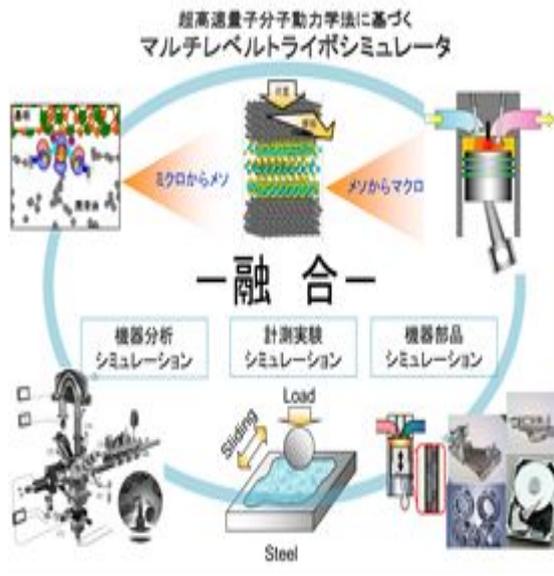
キーワード：マルチレベル 量子分子動力学 トライボケミカル シミュレータ 摩擦

1. 研究開始当初の背景

量子論のような原子・分子レベルの理論を基礎に自動車用エンジンのような実用部品・機器を解析することは永年の理論研究者の夢であった。この目標実現に向けて、これまで培ってきたマルチレベルトライボロジーシミュレータに加え、最近ではトライボロジー分野の機器分析、計測試験方法が飛躍的に進歩しているので、両方法の融合による発展が期待されている。

2. 研究の目的

上述のようなトライボロジー分野における研究者の夢と社会からの大きな期待を実現するために、本基盤研究(S)では、マルチレベルシミュレーションとトライボロジー分析、トライボロジー計測、トライボ部品シミュレーションとの融合した実験融合マルチレベルトライボシミュレータ(参考図1)を世界に先駆けて開発するとともに、実験研究者との連携を推進するシミュレス可視化・シミュレーション手法とともに、トライボロジーに係る研究開発手法を飛躍的に革新する。実物材料・実物条件を扱う実験研究と量子化学を中心とする理論研究が協奏・融合することにより、初めて、未来のトライボロジー技術開発を支える強力な方法論が構築されることを期待したからである。



参考図1 実験・計測融合マルチレベルトライボロジーシミュレータ概念図

3. 研究の方法

上記の研究目的を実現するには、多彩な要素シミュレータの開発が必要になる。具体的には、下記(1)-(6)の課題について研究を進めた。

- (1) 実験トライボロジーで現れる実構造・本物構造のコンピュータモデリング手法の開発
- (2) 実構造・本物構造モデルからのトライボ

ロジー物性の理論予測手法の開発

- (3) 原子レベルからの積上げによるトライボ計測・トライボ試験結果予測手法の開発
- (4) 原子レベルからの積上げによるトライボ部品・トライボ機器摩擦・摩擦挙動予測手法の開発
- (5) 実験研究者との共同を加速するためのヒューマンインターフェースの開発
- (6) 実験研究者との共同による開発シミュレータの有効性の検証と課題抽出

4. 研究成果

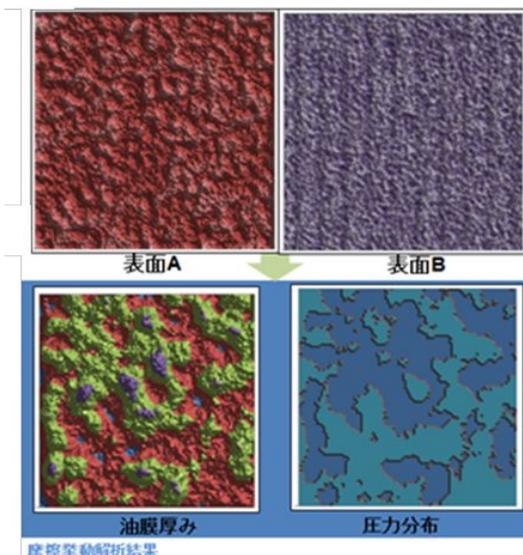
5年間の研究活動を通して、上記の研究目的について多くの成果を得ることが出来た。具体的な成果は、研究方法で記した(1)-(6)の課題ごとに以下に詳述するとともに、当初の目的を超えた新しい成果についても多く得られたので、それは(7)に記述する。

- (1) 実験トライボロジーで現れる実構造・本物構造のコンピュータモデリング手法の開発

材料のトライボロジー特性は、その材料の組成、結晶状態、欠陥状態に大きく影響されるので、実用トライボロジーで現れる実構造・本物構造のモデリングが不可欠となる。本基盤(S)研究では、実験的な構造解析で使用されるラマン分光、X線回折、中性子線回折、赤外線分光、XPS、AFM、STM、AFM、SEM、SFG(和周波発生)分光、発光スペクトル自体をシミュレーションするソフトウェアを開発し、それを活用することにより、世界に先駆けて多彩な材料のモデリングを具体的には、高分子基板メソ構造、トライボ界面マクロテクスチャー構造、トライボ表面デポジット吸着構造、トライボ界面メソ・マクロ複合テクスチャー構造作成ソフトウェア、鉄系トライボ表面、DLC系トライボ表面、真鍮系・アルミニウム系トライボ表面、準結晶ミクロ金属構造、鋳造エンジンボア構造、ステンレス材腐食構造、溶射法エンジンボア構造、自動変速機用摩擦材分子構造、アミン系摩擦調整剤分子構造、金属表面メソ酸化膜、摩擦表面メソ粒子構造、自動変速機用ファイバー構造、自動変速機用摩擦材メソ構造、摩擦材表面分子構造などのモデリングを実現した。これと既存の第一原理分子動力学法に比べて1000万倍の高速化を実現した超高速化量子分子動力学法に基づくマルチスケール・マルチフィジックス手法によるモデリングを併用することによりさらに的確な実構造・本物構造のモデリング手法を実現した。

世界的に見ても研究が遅れているメソ・マクロテクスチャー構造をもつトライボ界面については、AFM、STMの計測結果をもとに、例えば参考図2のようなモデリングを行うが、これらが摩擦・摩耗過程を経てどのように変化するかというメソレベルの動的変化のトライボロジーシミュレータについても、

多くの応用事例について開発した。



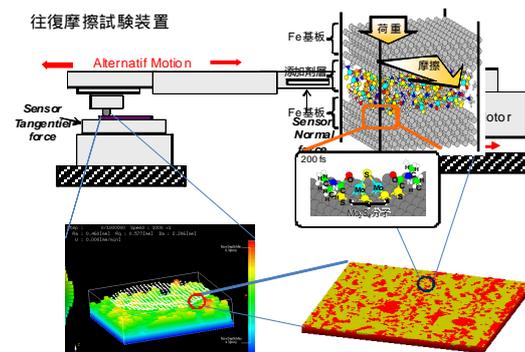
参考図 2 トライボ界面メソ・マクロテクスチャ構造

(2) 実構造・本物構造モデルからのトライボロジー物性の理論予測手法の開発

様々な実用トライボロジーに係る局所的な実構造変化が明らかになると、それらの局所構造変化が、トライボロジーに関係する様々な機械的、物理的、化学的物性にどのように影響するかの評価が重要になる。本基盤(S)研究では、これも世界に先駆けて、(1)で構築した実構造・本物構造をもとに、量子分子動力学法、有限要素法、分子動力学法を様々な形に改良して、トライボ界面圧力分布、ベースオイル粘性係数、ベースオイル中脂肪酸分子拡散係数、基油存在下複雑トライボ界面摩擦係数、自動車エンジン潤滑油膜熱伝導度、準結晶金属ミクロ電気伝導度、多成分系材料熱伝導度、炭化水素中のフッ素系分子拡散係数、表面近傍フッ素系分子拡散係数、溶射法準結晶メソ熱伝導度予測手法を開発した。摩擦係数、弾性係数、ポアソン比など機械的物性評価には、実構造に基づく局所的な原子間ポテンシャルの決定が不可欠となるが、この目的のためには、既存の第一原理分子動力学法に比べ1000万倍の高速化を実現した超高速化量子分子動力学法を活用した。さらに、この方法に基づく高い計算精度も多彩な系に関して実証した。

多くの実験研究者との共同研究において、実用トライボロジー材料の熱伝導度評価の重要性が明らかとなった。トライボロジー界面での熱伝導には、格子振動に基づくフォノン伝導と電子伝導の両方が影響する。フォノン伝導による熱伝導には、高速化量子分子動力学法に基づく原子間ポテンシャル評価が有効となるが、電子伝導にも高速化量子分子動力学法によるバンド評価が有効とある。それらをもとに、単純な系の熱伝導度だけでな

く、準結晶、ヘテロ界面をもつ系など多様な実用トライボロジー材料系の熱伝導度予測も実現した。これも他の研究にはない、本研究の大きな成果である。



参考図 3 往復摺動試験シミュレータ

(3) 原子レベルからの積み上げによるトライボ計測・トライボ試験結果予測手法の開発

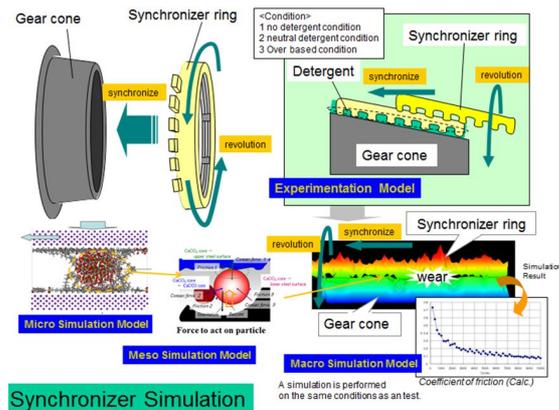
実験的なトライボロジー研究では、比較的小規模で様々な試験が可能なトライボ計測、トライボ試験が実施されている。それらの計測・試験で実用機器の特性を予測できることもあるが、実験条件の違いなど、実用機械の特性との乖離が起こる場合も少なくない。また、試験結果の原子・分子レベルでの解明にも課題が少なくない。そこで、本基盤(S)研究では、多彩なトライボ計測・トライボ試験自体のシミュレータ開発を行った。参考図3は、往復摺動試験装置シミュレータであるが、その他にもピンオンディスク、リングオンディスク、転がり摩擦試験、ボール通し試験シミュレータなど実験で汎用される試験機のシミュレータを開発した。これにより、実験研究者が使用する装置での具体的なトライボ材料、添加剤について具体的に計算することが可能となり、多くの共同研究で活用された。これらの装置では、摩擦潤滑挙動だけでなく、劣化挙動の解析、電気伝導度の測定なども行われ、マルチスケール・マルチフィジックス計算化学手法で開発して様々なシミュレータのリンクも進めることが出来た。

これらのシミュレータにおけるミクロ物性は、(1)、(2)で述べたように、原子レベルからの積み上げがなされているので、計測・試験結果の原子・分子レベルでの解明に役立つだけでなく、新しいトライボシステムの開発にも繋げることが出来る。具体的な共同研究ではそのような研究を進めることが出来た。これも既往の他の研究にはない、本研究の世界レベルでの特徴となっている。

(4) 原子レベルからの積み上げによるトライボ部品・トライボ機器摩擦・摩擦挙動予測手法の開発

実物モデルに基づく原子レベルからの積

上げによるマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションを社会が必要とする実用の部品、機器の開発において推進するためには、トライボ部品・トライボ機器摩擦摩耗予測手法の開発が必要となり、本基盤(S)研究では、いくつかのトライボ部品、トライボ機器シミュレータを開発した。



参考図 4 シンクロナイザーシミュレータ

参考図 4 は自動車用シンクロナイザーのためのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレータである。シンクロナイザーシミュレータの構成であるが、これをもとに、ギアコーン、リング、オイル、添加剤などマイクロメゾマクロをシームレスにモデル化、シミュレーションし、摩擦・摩耗挙動の解析を進めた。同様に、自動車用エンジン・ピストンリングシミュレータ、軸受シミュレータ、スノースキーシミュレータなどを世界に先駆けて開発し、産学連携による実験研究者との共同研究に活用した。このような原子レベルからの積上げによるトライボ部品、トライボ機器のシミュレータも、既往の研究にはない、本基盤(S)研究の世界レベルでの特徴となっている。

(5) 実験研究者との共同を加速するためのヒューマンインターフェイスの開発

マイクロレベル、メソレベル、マクロレベルでの可視化手法は既に開発しているので、それらを、ズームイン、ズームアウトなどシームレスに可視化する手法を開発して、シミュレーション結果をもっと実験研究者に理解しやすくするように工夫した。具体的には、参考図 4 に示したようにマルチレベルのシンクロナイザーシミュレータについて、そのようなシステムを実現した。

(6) 実験研究者との共同による開発シミュレータの有効性の検証と課題抽出

トライボロジー実験研究において世界的にも第一人者であるリヨン工科大学の Jean Michel Martin 教授を含めて、企業を含む国内外の多くの実験研究者との連携を進め、本

研究で開発したシミュレータの有効性を検証するとともに、新たな発展課題にも挑戦して、本基盤(S)研究のインパクトを強めることが出来た。それら新しい連携、共同研究の中には、スノースポーツ分野、原子力分野の企業・大学等との共同も生まれ、既往の機械・自動車分野に留まらない多彩な分野への応用可能性を示すことが出来た。どの分野でも、本基盤(S)研究により、既往の研究にはない世界的にみてもオリジナルな研究を展開できた。

(7) 開発シミュレータへの人工知能手法の融合

本基盤研究(S)の5年間の研究期間の中で、ビッグデータ、IoTとも関連して人工知能(AI)手法が大きく発展し、社会の期待も広がった。本研究は、量子力学という基本原理をベースに基礎からの積上げによりトライボロジー機器、部品の性能を予測するという内容であるが、それがIoT、センサーを通して現実の機器の複雑な挙動と結び付けば、世界のどこにもない強力な研究手法となる。そのような考えのもと、本研究の中でも人工知能との融合を様々な形で推進し、有効性を実証することが出来た。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計41件)

H. Nishihara, H. Fujimoto, H. Itoi, K. Nomura, H. Tanaka, M. T. Miyahara, P. A. Bonnaud, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, N. Hatakeyama, A. Miyamoto, K. Ikeda, T. Otomo, and T. Kyotani, Graphene-based ordered framework with a diverse range of carbon polygons formed in zeolite nanochannels, Carbon, 査読有、129 (2018) 854-862.

<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.12.055>

N. Miyamoto, T. Morimoto, S. Mori, T. Miura, K. Okushi, P.A. Bonnaud, R. Miura, A. Suzuki, N. Hatakeyama, Akihiro Isomura, A. Miyamoto, M. Hariyama, A Portable Post-Processed Kinematic GNSS Receiver for Advanced Ski Measurements, Science and Skiing, 査読有、7 (2017) 386-393.

J. Okajima, T. Okabe, N. Miyamoto, T. Morimoto, N. Hatakeyama, K. Tsunoda, T. Sasaki, K. Kosugi, K. Ito, M. Suzuki, T. Shoji, S. Maruyama, A. Miyamoto, A. Isomura, Accurate Temperatruue Measurement of Interface between Ski and Snow Surface for Frictional Heating Evaluation, Science and Skiing, 査読有、7 (2017) 394-400.

T. Ito, H. Hosokawa, T. Kawasaki, Y. Ishizawa, K. Inaba, N. Hatakeyama and

A. Miyamoto, Development of a method to lower recontamination after chemical decontamination by depositing Pt nano particles: (II) consideration of the Pt effect on oxide composition, *Journal of Nuclear Science and Technology*, 査読有、54 (2017) 312-321. 10.1080/00223131.2016.1262296

A. Suzuki, P. Bonnaud, M. C. Williams, P. Selvam, N. Aoki, M. Miyano, A. Miyamoto, J. Saito, K. Ara, Effect of the Titanium Nanoparticle on the Quantum Chemical Characterization of the Liquid Sodium Nanofluid, *J. Phys. Chem. B*, 査読有、20 (2016) 3527-3539.

畠山 望, 長山千恵子, 畑 北斗, 石澤由紀江, 佐藤 亮, ボノー パトリック, 三浦隆治, 鈴木 愛, 宮本 明, マルチスケール計算化学に基づく汚れ付着シミュレーション技術の開発, *Journal of Computational Chemistry, Japan*, 査読有、15 (2016) 221-222. 10.2477/jccj.2016-0060

A. Miyamoto, K. Inaba, Y. Ishizawa, M. Sato, R. Komuro, M. Sato, R. Sato, P. Bonnaud, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, N. Hatakeyama, and M. Hariyama, Multiscale, Multiphysics Computational Chemistry Methods based on Artificial Intelligence Integrated Ultra-Accelerated Quantum Molecular Dynamics for the Application to Automotive Emission Control, *SAE Technical Paper*, 査読有、32-0067 (2016) 1-8. 10.4271/2016-32-0067

P.A. Bonnaud, H. Manzano, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, N. Hatakeyama, and A. Miyamoto, Temperature Dependence of Nanoconfined Water Properties: Application to Cementitious Materials, *Journal of Physical Chemistry C*, 査読有、120 (2016) 11465-11480. 10.1021/acs.jpcc.6b00944

P.A. Bonnaud, C. Labbez, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, N. Hatakeyama, A. Miyamoto, and K. J. Van Vliet, Interaction grand potential between calcium-silicate -hydrate nanoparticles at the molecular level, *Nanoscale*, 査読有、8 (2016) 4160-4172. 10.1039/c5nr08142d

S. Loehle, C. Matta, C. Minfray, T. Le Mogne, R. Iovine, Y. Obara, A. Miyamoto, J.M. Martin, Mixed lubrication of steel by C18 fatty acids revisited. Part II: Influence of some key parameters, *Tribology International*, 査読有、94(2016)

207-216.

W. Winkler, A. Suzuki, A. Miyamoto, H. Yokokawa, M. C. Williams, Performance Envelope for Electrolyser Systems, *ECS Transactions*, 査読有、65 (2015) 253-262.

S. Loehle, C. Matta, C. Minfray, T. Le Mogne, R. Iovine, Y. Obara, R. Miura, A. Miyamoto, J.M. Martin, Mixed Lubrication with C18 Fatty Acids: Effect of Unsaturation, *Tribology Letter*, 査読有、53 (2014), 319-328., N. Hatakeyama, K. Araki, H. Kubota, M. Miura, K. Okushi, R. Miura, A. Suzuki, A. Isomura, A. Miyamoto, Y. Yaegashi, J. Sato, K. Fujita, Experiment-Integrated Computational Chemistry Simulation of Ski Wax Penetrated into Running Surface, *Science and Skiing*, 査読有、6 (2014) 168-176.

A. Miyamoto, K. Araki, H. Kubota, M. Miura, K. Okushi, R. Miura, A. Suzuki, N. Hatakeyama, A. Isomura, Y. Yaegashi, J. Sato, K. Fujita, Multiscale Multiphysics Computational Chemistry Simulation Applied to Ski Wax Tribology, *Science and Skiing*, 査読有、6(2014) 215-233.

Y. Morita, S. Jinno, M. Murakami, N. Hatakeyama and A. Miyamoto, A computational chemistry approach for friction reduction of automotive engines, *International Journal of Engine Research*, 査読有、15(2014) 339-405.

A. Suzuki, M. C. Williams, Y. Oono, R. Miura, N. Hatakeyama, M. Hori, A. Miyamoto, Influence of the Sintering of Electrocatalysts and Decrease of Proton Conductivity on the Current-Voltage Performance in the High-Temperature Proton Exchange Membrane Fuel Cells (HT-PEMFC), *ECS transaction*, 査読有、61(2014) 7-22.

J.-M. Martin, T. Onodera, M. I. De Barros Bouchet, N. Hatakeyama, A. Miyamoto, Anti-wear Chemistry of ZDDP and Calcium Borate Nano-Additives. Coupling Experiments, Chemical Hardness Predictions and MD Calculations, *Tribology Letters*, 査読有、50(2013) 95-104.

「その他24件」

〔学会発表〕(計153件)

K. Okushi, P. Bonnaud, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, N. Hatakeyama, A. Miyamoto, T. Honda, Simulation of Initial Conformability and Seizure on Tribo-Test Machine、6th World Tribology Congress (WTC2017)、2017年

9月19日、Beijing, China.

大串巧太郎、ボノー・パトリック、三浦隆治、鈴木 愛、宮本直人、畠山 望、宮本 明、梶木悠一朗、倉部陽平、すべり軸受の損傷におけるメソトライボロジーシミュレータの開発、トライボロジー会議 2017 春、2017 年 5 月 15 日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京.

N. Hatakeyama, P. A. Bonnaud, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, M. Hariyama, and A. Miyamoto, Artificial Intelligence Integrated Multiscale, Multiphysics Computational Chemistry Methods Based on Ultra-Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics for Advanced Materials, The 25th Anniversary Meeting of APAM (Asia-Pacific Academy of Materials), 2017 年 4 月 11 日、Sendai, Japan

K. Inaba, Y. Ishizawa, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, N. Hatakeyama, A. Miyamoto, Molecular Simulation Study for Nano-Car Molecule on Au Surface, Fourteenth International Conference of Flow Dynamics (ICFD2017), 2017 年 11 月 2 日、Sendai, Japan

A. Miyamoto, P. Bonnaud, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, N. Hatakeyama, M. Hariyama, Artificial Intelligence Integrated Multiscale, Multiphysics Computational Methods for Catalytic Technologies, 16th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-16), 2016 年 6 月 23 日, Zakopane, Poland

A. Miyamoto, P. Bonnaud, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, N. Hatakeyama, M. Hariyama, Artificial Intelligence Integrated Multiscale, Multiphysics Computational Methods for Smart and Multifunctional Materials, CIMTEC 2016, 2016 年 6 月 8 日, Perugia, Italy.

A. Miyamoto, P. Bonnaud, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, N. Hatakeyama, S. Kozawa, and M. C. Williams, Theoretical Calculations of Local Physico-Chemical-Mechanical Properties based on Ultra-Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics for Multiscale, Multiphysics Tribological Simulation, 2016 STLE Annual Meeting & Exhibition, 2016 年 5 月 19 日、Las Vegas, USA.

A. Miyamoto, R. Miura, A. Suzuki, N. Miyamoto, N. Hatakeyama, Multiscale, Multiphysics Computational Chemistry Methods for Automotive Engine Tribology, 20th International Colloquium Tribology (TAE), 2016 年

1月13日、Esslingen, Germany

「その他 145 件」

〔図書〕(計7件)

畠山 望, 大串巧太郎, 三浦隆治, 鈴木 愛, 宮本 明, テクノシステム、数値解析と表面分析によるトライボロジー現象の解明とその制御 第6章 数値解析, 第12節 [トライボシミュレータの開発], 2018 年、7 pages.

畠山 望, 三浦隆治, 鈴木 愛, 宮本 明, シーエムシー出版、触媒劣化 - 原因、対策と長寿命触媒開発, 第1編 基礎, 第3章 触媒劣化の解析, 第6節「シタリングによる触媒劣化のシミュレーション」, 2018 年、126-131.

畠山 望, 宮本 明, エヌ・ティー・エス、表面・界面技術ハンドブック～材料創製・分析・評価の最新技術から先端産業への適用、環境配慮まで～, 第2編 表面・界面を観る, 測る, 予測するには, 第2章 各論, 第5節 表面・界面形成過程を予測するには, 第2項「表面・界面反応の超高速化量子分子動力学シミュレーション」, 2016 年、354-360.

「その他 4 件」

〔その他〕

新聞報道等 (計6件)

朝日新聞 平成 26 年 7 月 25 日 滑るスキー 夏も研究

「その他 5 件」

ホームページ等

<http://www.aki.che.tohoku.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

宮本 明 (MIYAMOTO, Akira)

東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授

研究者番号：50093076

(2) 研究分担者

畠山 望 (HATAKEYAMA, Nozomu)

東北大学・未来科学技術共同研究センター・准教授

研究者番号：50312666

鈴木 愛 (SUZUKI, Ai)

東北大学・未来科学技術共同研究センター・准教授

研究者番号：40463781

三浦隆治 (MIURA, Ryuji)

東北大学・未来科学技術共同研究センター・助教

研究者番号：00570897